

**STUDI ADSORPSI MOLEKUL CO PADA UJUNG TERBUKA SINGLE WALLED  
CARBON NANOTUBE (SWCNT) (8,0) MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS  
AM1**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh:**

**RAHMAYANI**

**BP : 1310411084**

**Pembimbing 1 : Imelda, M.Si**

**Pembimbing 2 : Emdeniz, M.S**



**JURUSAN S1 KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2017**

## INTISARI

### STUDI ADSORPSI MOLEKUL CO PADA UJUNG TERBUKA SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE (SWCNT) 8,0 MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS AM1

Oleh:

Rahmayani (BP: 1310411084)  
Imelda, M.Si dan Emdeniz, M.S

Penelitian mengenai adsorpsi CO pada ujung terbuka SWCNT (8.0) telah dilakukan menggunakan metoda Semiempiris AM1 dari paket *Hyperchem* 8. Molekul CO mengalami interaksi secara fisika dan kimia pada SWCNT ujung terbuka, dan sebagian molekul CO dilepaskan (desorpsi). Penjatuhan molekul CO dapat menurunkan  $\Delta E$  SWCNT (8.0). Penjatuhan molekul CO pada ujung terbuka SWCNT(8.0) *on top* nilai  $\Delta E$  berkisar antara 2,408384-3,305947eV. Nilai  $\Delta E$  terkecil didapatkan pada penjatuhan 2 molekul CO pada atom C dengan nilai  $\Delta E = 2,408384$ . Penjatuhan 2 molekul CO pada posisi tersebut sangat potensial untuk meningkatkan hantaran listrik dari SWCNT. Penjatuhan molekul CO menyebabkan peningkatan BE dan  $E_{ads}$  permolekul seiring dengan bertambahnya jumlah molekul CO yang di jatuhkan, menunjukkan bahwa SWCNT potensial digunakan sebagai penyerap gas CO.

**Kata Kunci:** *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT), molekul CO, AM1

## ABSTRACT

### STUDY OF CO MOLECULE ADSORPTION ON OPEN ANDED SINGLE WALLED CARBON NANOTUBE (SWCNT) 8,0 USING SEMIEMPIRICAL AM1 METHOD

By

**Rahmayani (BP: 1310411084)**  
**Imelda, M.Si dan Emdeniz, M.S**

The research about adsorption of CO on the of open ended SWCNT (8.0) using the Semiempiris AM1 method of package Hyperchem 8 has been done. CO molecules were adsorbed physically and chemically on SWCNT open ended, and partially CO molecules are (desorption). The dropped of CO molecules can reduce the  $\Delta E$  SWCNT (8.0). Band gap ( $\Delta E$ ) value of CO molecules were dropped on top are 2,408384-3,305947eV.  $\Delta E$  smallest value is obtained in the imposition of CO 2 molecules on atom C with a value of  $\Delta E$  is 2.408384eV. The dropped of 2 CO molecules in these positions potentially increase the electrical conductivity of SWCNT. The dropped of a CO molecule causes increase in BE and Eads per molecule as the number of molecules of CO in the drop, indicating that the potential to be used as an absorbent SWCNT CO gas.

**Keyword:** *Single Walled Carbon Nanotube (SWCNT), CO molecules, AM1*